

УДК 669.018.28

### МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ФОРМИРОВАНИЯ ЛИТОЙ СТРУКТУРЫ ВЫСОКОПРОЧНОГО ЧУГУНА

**И.В. РАФАЛЬСКИЙ**, канд. техн. наук, **П.Е. ЛУЩИК**, канд. техн. наук,  
**Д.С. МОРОЗОВ**

РИУП «НТП БНТУ «Политехник»

**А.И. ПОКРОВСКИЙ**, канд. техн. наук

ГНУ Физико-технический институт НАН Беларуси

*Разработана математическая модель формирования литой структуры при затвердевании высокопрочного чугуна, описывающая процесс образования и роста графитных включений шаровидной (сферической) формы в системе Fe-C. Математическая постановка задачи включает уравнения нестационарной теплопроводности с учетом выделения теплоты кристаллизации при фазовом переходе и сферической диффузии с подвижной межфазной границей в системе «расплав Fe-C – шаровидный графит». Представлена модель элементарной эвтектической ячейки для шаровидного включения графита, расчетный радиус которой определяется с учетом эвтектической концентрации углерода и предельной растворимости углерода в железе при эвтектической температуре. Получено численное решение разработанной модели методом конечных разностей с заданным шагом пространственной сетки на основе алгоритма обратного хода вычислений по временным слоям до момента, при котором выполнялось условие достижения эвтектической концентрации для элементарной эвтектической сферической ячейки заданного радиуса. Установлены расчетные зависимости концентрации углерода и скорости диффузионного роста от времени кристаллизации в середине включений шаровидного графита различного радиуса.*

**Ключевые слова:** система Fe-C, высокопрочный чугун, шаровидный графит, моделирование литой структуры.

## MODELING THE FORMATION OF CAST STRUCTURES IN DUCTILE IRON

I.V. RAFALSKI, Ph. D in Technical Sciences, P.E. LUSHCHIK, Ph. D  
in Technical Sciences, D.S. MOROZOV

Science and Technology Park of BNTU «Polytechnic»

A.I. POKROVSKI, Ph. D in Technical Sciences  
Institute of Physics and Technology of National Academy  
of Sciences of Belarus

*A mathematical model has been developed for the formation of cast structures during solidification of ductile iron, which describes the process of formation and growth of graphite inclusions of a spherical (spherical) shape in the Fe-C system. The mathematical formulation of the problem includes the equations of non-stationary thermal conductivity taking into account the release of the heat of crystallization during the phase transition and spherical diffusion with a movable interface in the system «Fe-C melt - nodular graphite». A model of an elementary eutectic cell for a spherical inclusion of graphite is presented, the calculated radius of which is determined taking into account the eutectic concentration of carbon and the limiting solubility of carbon in iron at the eutectic temperature. A numerical solution of the developed model is obtained by the finite difference method with a given step of the spatial grid on the basis of the algorithm for backward computations over time layers until the moment at which the condition for reaching the eutectic concentration for an elementary eutectic spherical cell of a given radius is satisfied. The calculated dependences of the carbon concentration and the rate of diffusion growth on the crystallization time in the middle of nodular graphite inclusions of various radii have been established.*

**Keywords:** Fe-C system, ductile iron, nodular graphite, cast structure simulation.

**Введение.** Высокопрочный чугун со сферическим графитом, полученный в процессе изотермической термообработки, характеризуется высоким комплексом технологических и механических свойств при более низкой стоимости получения, обеспечивая конкурентные преимущества по сравнению с другими чугунами, стальными отливками и поковками, что делает его перспективным конструкционным материалом для ряда ответственных машиностроительных изделий (поршневые и уплотнительные кольца, блоки цилиндров, коленчатые и распределительные валы, тормозные ба-

рабаны, диски сцепления, ступицы колес, коробки дифференциалов, кронштейны, гидравлические муфты, подвески рессор, картеры задних мостов) [1].

Важнейшей задачей исследования высокопрочных чугунов является изучение эволюции и моделирование его микроструктуры в процессе затвердевания [2]. Однако разработка математических моделей структурообразования и графитизации является одним из наиболее сложных вопросов теории чугуна, поскольку этот материал представляет собой многокомпонентный сплав системы Fe-C, который в различных условиях затвердевания может образовывать разнообразные структуры со стабильной эвтектикой «железо-графит» или метастабильной эвтектикой Fe-Fe<sub>3</sub>C. При этом сам механизм формирования графитных включений различной морфологии в чугунах до конца не ясен и также является предметом исследований [3]. Таким образом, ключевой задачей моделирования литой структуры высокопрочного чугуна является математическое описание процесса образования и роста графитных включений шаровидной (сферической) формы в процессе затвердевания.

**Математическая постановка задачи.** Расчетная схема для построения математической модели формирования графитных включений шаровидной (сферической) формы в системе Fe-C представлена на рисунке 1.

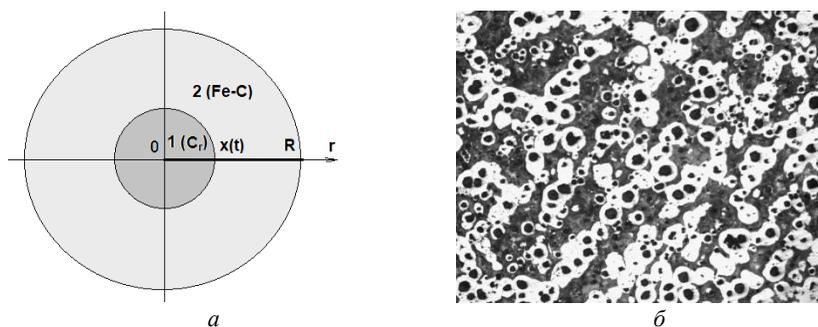


Рисунок 1 – Расчетная схема (а) для математического моделирования формирования графитных включений шаровидной (сферической) формы в системе Fe-C (1 – шаровидный графит; 2 – расплав высокопрочного чугуна) и микроструктура феррито-перлитного высокопрочного чугуна с шаровидным графитом (б)

Расчетный радиус элементарной эвтектической ячейки для шаровидного включения графита радиусом  $R_C$  определялся с учетом эвтектической концентрации углерода ( $N_E$ ) и предельной растворимости углерода в железе ( $N_S$ ) при эвтектической температуре:

$$R = \left( 1 + \frac{\rho_C \cdot (1 - N_E)}{\rho_{\text{Fe-C}} \cdot (N_E - N_S)} \right)^{1/3} \cdot R_C, \quad (1)$$

где  $\rho_C$  – плотность графита, кг/м<sup>3</sup>;  $\rho_{\text{Fe-C}}$  – плотность раствора углерода в  $\gamma$ -Fe при содержании в нем 2,14 % C, кг/м<sup>3</sup>.

Математическая постановка задачи включала уравнения нестационарной теплопроводности с учетом выделения теплоты кристаллизации при фазовом переходе для сферически симметричных тел (включений шаровидного графита) и сферической диффузии с подвижной межфазной границей в системе «расплав Fe-C – шаровидный графит»:

$$\left\{ \begin{array}{l} c_1 \rho_1 \frac{\partial T_1}{\partial t} = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( \lambda_1 r^2 \frac{\partial T_1}{\partial r} \right), 0 < r < x(t), t > 0; \\ c_2 \rho_2 \frac{\partial T_2}{\partial t} = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( \lambda_2 r^2 \frac{\partial T_2}{\partial r} \right) + \rho_2 L_2 \frac{\partial f_{S2}}{\partial t}, x(t) < r < R, t > 0; \\ t = 0: T(r) = T_0, \quad 0 \leq r \leq R; \\ r = 0: \frac{\partial T}{\partial r} = 0; \quad t > 0; \\ x = R: T = T_p; \quad t > 0, \end{array} \right. \quad (2)$$

где  $T$  – температура, К;  $t$  – время, с;  $\lambda_1, \lambda_2$  – теплопроводность графита и чугуна, соответственно, Вт/(м·К);  $c_1, c_2$  – удельная теплоемкость графита и чугуна, соответственно, Дж/(кг·К);  $\rho_1, \rho_2$  – плотность графита и чугуна, соответственно, кг/м<sup>3</sup>;  $L$  – удельная теплота кристаллизации, Дж/кг;  $f_S$  – функция тепловыделения, которая определяется объемной долей затвердевающей фазы при фазовом

превращении, о. е.;  $T_0$  – начальная температура расплава Fe-C, К;  $T_p$  – температура поверхности формы, К.

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial N_1}{\partial t} = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( D_1 r^2 \frac{\partial N_1}{\partial r} \right), 0 < r < x(t), \quad t > 0; \\ \frac{\partial N_2}{\partial t} = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( D_2 r^2 \frac{\partial N_2}{\partial r} \right), x(t) < x < R, \quad t > 0; \\ t = 0 : N(r) = 1, \quad 0 \leq r \leq x(t); \\ t = 0 : N(r) = N_0, \quad x(t) < r \leq R; \\ r = 0 : \frac{\partial N}{\partial r} = 0; \quad t > 0; \\ x = R : \frac{\partial N}{\partial r} = 0; \quad t > 0; \\ r = x(t) : D_1 \frac{\partial N_1}{\partial t} - D_2 \frac{\partial N_1}{\partial t} = (N_f^1 - N_f^2) \frac{dx}{dt}, \end{array} \right. \quad (3)$$

где  $D_1, D_2$  – коэффициенты диффузии углерода в графите и чугуна, м<sup>2</sup>/с;  $N_1, N_2$  – концентрация углерода в графите и чугуна, о. е.;  $N_f^1, N_f^2$  – концентрация углерода на левой и правой межфазной границах при данной температуре;  $N_0$  – начальная концентрация углерода в расплаве Fe-C ( $N_0 = 0,0214$  о. е.);  $x(t)$  – текущее положение межфазной границы раздела, м.

Значения  $N_f^1, N_f^2$  концентрации атомов углерода на левой и правой межфазной границах при данной температуре определены как зависимости предельной растворимости при данной температуре, т. е. как функции от температуры с использованием данных диаграмм состояния сплавов Fe-C.

Моделирование процесса формирования шаровидного включения графита заданного радиуса проводилось при следующих допущениях:

- перенос атомов углерода и рост включения графита осуществляется посредством диффузии;
- конвекция в жидкой фазе является незначительной;
- коэффициент диффузии зависит от температуры и в расплаве слабо зависит от состава жидкой фазы;
- зона контакта является сферической;
- температура эвтектической кристаллизации составляет 1153 °С;
- эвтектическая концентрация углерода ( $N_E$ ) составляет 4,3 % (мас.);
- предельная растворимость углерода в железе ( $N_S$ ) при эвтектической температуре составляет 2,14 % (мас.).

На основе математической модели формирования шаровидного включения графита заданного радиуса разработан алгоритм и выполнена программная реализация численного решения задачи моделирования процесса формирования литой структуры при затвердевании высокопрочного чугуна.

Представленная модель численно решалась методом конечных разностей (МКР) с заданным шагом пространственной сетки на основе алгоритма обратного хода вычислений по временным слоям до момента, при котором выполнялось условие достижения эвтектической концентрации ( $N_E = 0,043$ ) для элементарной эвтектической ячейки радиусом  $R$ , с использованием явной разностной схемы на равномерной сетке

$$\Omega_{\tau h} = \{x_i = ih, i = \overline{0, K_h}, \tau^j = j\Delta\tau, j = \overline{0, K_\tau}\}, \quad (4)$$

где  $i, j$  – индексы при расчетных узлах, принимающие целочисленные значения от нуля до  $K_h$  и  $K_\tau$  соответственно;  $K_h$  и  $K_\tau$  – параметры, определяющие число расчетных узлов соответственно для координаты  $x$  и времени  $\tau$ ;  $h, \Delta\tau$  – шаг изменения параметров  $x$  и  $\tau$  соответственно.

Расчет температур проводили в предположении равномерного (линейного) характера тепловыделения, вызванного кристаллизацией расплава чугуна. Функция тепловыделения, обусловленная образованием и ростом твердой фазы  $f_S$  в интервале кристаллизации сплава ( $T_S - T_L$ ), определялась из соотношения

$$\frac{\partial f_S}{\partial t} = \frac{df_S}{dT} \cdot \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{1}{T_S - T_L} \cdot \frac{\partial T}{\partial t}. \quad (5)$$

Основное дифференциальное уравнение теплопроводности с учетом соотношения (5) принимает следующий вид:

$$c(T)\rho(T)\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( \lambda(T)r^2 \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \rho(T)L \frac{1}{T_S - T_L} \cdot \frac{\partial T}{\partial t}, \quad (6)$$

или

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{(T_S - T_L)}{\rho(T) \cdot [c(T)(T_S - T_L) - L]} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( \lambda(T)r^2 \frac{\partial T}{\partial r} \right). \quad (7)$$

Расчет температуры проводили на основе численного решения дифференциального уравнения (4) после аппроксимации частных производных конечными разностями:

$$\begin{aligned} \frac{(T_i^{j+1} - T_i^j)}{\tau} &= \frac{(T_S - T_L)}{\rho(T_i^j) \cdot [c(T_i^j) \cdot (T_S - T_L) - L]} \cdot \frac{1}{r_i^2 h} \times \\ &\times \left( \lambda_{i+1/2}^j \cdot r_{i+1/2}^2 \frac{T_{i+1}^{j+1} - T_i^{j+1}}{h} - \lambda_{i-1/2}^j \cdot r_{i-1/2}^2 \frac{T_i^{j+1} - T_{i-1}^{j+1}}{h} \right), \quad (8) \\ &i = 2, \dots, K_h; j \geq 0, \end{aligned}$$

где

$$\lambda_{i+1/2}^j = \frac{\lambda_{i+1}^j + \lambda_i^j}{2}, \quad \lambda_{i-1/2}^j = \frac{\lambda_i^j + \lambda_{i-1}^j}{2}, \quad r_{i+1/2} = \frac{r_i + r_{i+1}}{2}, \quad r_{i-1/2} = \frac{r_{i-1} + r_i}{2}. \quad (9)$$

Расчет концентрации углерода проводили на основе численного решения дифференциальных уравнений диффузии после аппроксимации частных производных конечными разностями:

$$\begin{aligned} \frac{(N_j^{i+1} - N_j^i)}{\tau} &= \frac{1}{r_i^2} \frac{1}{h} \left( D_{i+1/2}^j \cdot r_{i+1/2}^2 \cdot \frac{N_{i+1}^{j+1} - N_i^{j+1}}{h} - D_{i-1/2}^j \cdot r_{i-1/2}^2 \cdot \frac{N_i^{j+1} - N_{i-1}^{j+1}}{h} \right), \quad (10) \\ &i = 2, \dots, K_h; j \geq 0 \end{aligned}$$

Значения удельной теплоемкости, теплопроводности, плотности и коэффициентов диффузии для железа и углерода в уравнениях (8–10) учитывались как функции от температуры.

Программная реализация разработанного алгоритма выполнена с использованием интегрированной среды разработки (IDE) Lazarus – программного обеспечения на основе компилятора Free Pascal с открытым исходным кодом, с широким функционалом расчетных и графических возможностей компонентов LCL (Lazarus Component Library) для численного решения задачи и визуализации результатов вычислений.

Для принятых в расчетах величин  $\rho_C = 2220 \text{ кг/м}^3$ ,  $\rho_{\text{Fe-C}} = 7800 \text{ кг/м}^3$ ,  $N_E = 0,043$  и  $N_S = 0,0214$  радиус элементарной эвтектической ячейки составил 2,388 радиуса шаровидного включения графита, что хорошо согласуется с экспериментальными данными микроструктурных исследований высокопрочного чугуна (рисунки 1, б).

На рисунках 2–4 представлены результаты численного анализа процесса формирования шаровидного включения графита: установленные зависимости концентрации углерода и скорости диффузионного роста от времени кристаллизации в середине включений шаровидного графита различного радиуса.

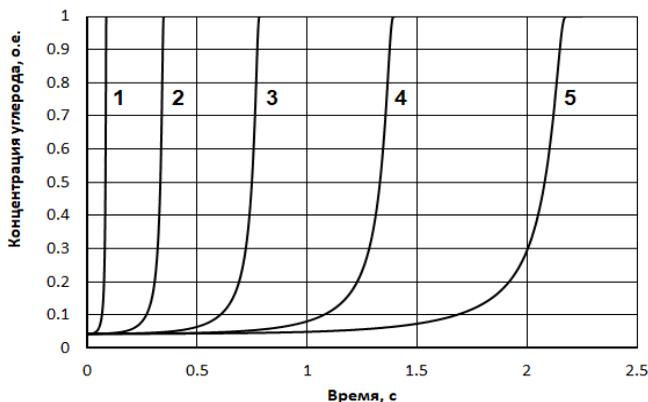


Рисунок 2 – Расчетная зависимость концентрации углерода от времени кристаллизации в середине включения шаровидного графита различного радиуса: 1 – 10 мкм; 2 – 20 мкм; 3 – 30 мкм; 4 – 40 мкм; 5 – 50 мкм

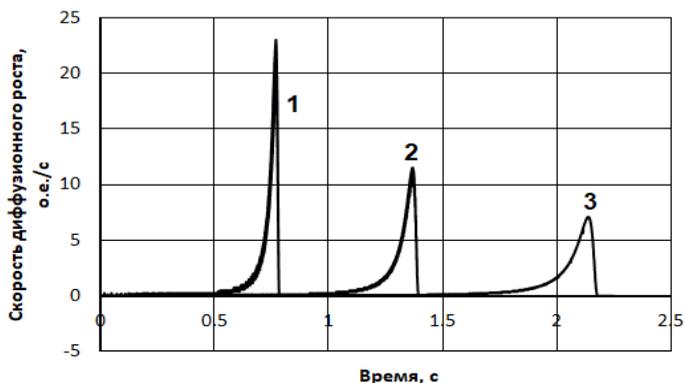


Рисунок 3 – Расчетная зависимость скорости диффузионного роста включений графита различного радиуса от времени кристаллизации:  
 1 – 30 мкм; 2 – 40 мкм; 3 – 50 мкм

На рисунке 4 представлена расчетная зависимость радиуса шаровидного включения графита от времени кристаллизации эвтектической ячейки.

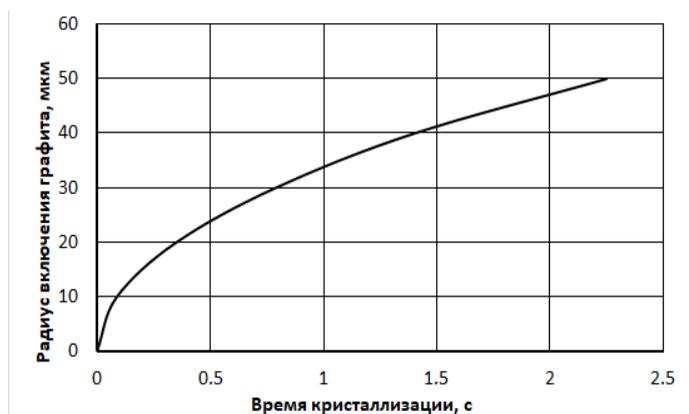


Рисунок 4 – Расчетная зависимость радиуса шаровидного включения графита от времени кристаллизации эвтектической ячейки

Полученные результаты могут служить теоретической основой при разработке технологических процессов комплексной обработки высокопрочного чугуна с использованием методов литья.

### Заключение.

1. Разработана математическая модель формирования литой структуры при затвердевании высокопрочного чугуна, описывающая процесс образования и роста графитных включений сферической формы в системе Fe-C, на основе уравнений нестационарной теплопроводности с учетом выделения теплоты кристаллизации при фазовом переходе и сферической диффузии с подвижной межфазной границей для малых значений времени в системе «расплав Fe-C – шаровидный графит».

2. Представлена модель элементарной эвтектической ячейки для шаровидного включения графита, расчетный радиус которой определяется с учетом эвтектической концентрации углерода ( $N_E$ ) и предельной растворимости углерода в железе ( $N_S$ ) при эвтектической температуре. Для принятых в расчетах величин  $\rho_C = 2220 \text{ кг/м}^3$ ,  $\rho_{\text{Fe-C}} = 7800 \text{ кг/м}^3$ ,  $N_E = 0,043$  и  $N_S = 0,0214$  радиус элементарной эвтектической ячейки составил 2,388 радиуса шаровидного включения графита, что хорошо согласуется с экспериментальными данными микроструктурных исследований высокопрочного чугуна.

3. Получено численное решение разработанной модели методом конечных разностей с заданным шагом пространственной сетки на основе алгоритма обратного хода вычислений по временным слоям до момента, при котором выполнялось условие достижения эвтектической концентрации для элементарной эвтектической сферической ячейки заданного радиуса. Установлены расчетные зависимости концентрации углерода и скорости диффузионного роста от времени кристаллизации в середине включений шаровидного графита различного радиуса.

### Список литературы

1. **Wang, B.** Microstructure, wear behavior and surface hardening of austempered ductile iron / B. Wang, F. Qiub, G.C. Barber [et al.] // Journal of Materials Research and Technology. – 2020. – Vol. 9. – P. 9838–9855.

2. **Stefanescu, D.M.** State of the Art in Solidification Modeling of Cast Iron / D.M. Stefanescu // Science and Processing of Cast Iron VIII, Edited by Li Y.X., Shen Houfa, Xu Q.Y. and Han Z.Q. – 2006. – Tsinghua University Press, Beijing. – P. 32–41.

**3. Ghassemali, E.** Revisiting the graphite nodule in ductile iron / E. Ghassemali, J.C. Hernando, D.M. Stefanescu [et al.] // Scripta Materialia. – 2019. – Vol. 161. – P. 66–69.

### References

1. **Wang, B.** Microstructure, wear behavior and surface hardening of austempered ductile iron / B. Wang, F. Qiub, G.C. Barber [et al.] // Journal of Materials Research and Technology. – 2020. – Vol. 9. – P. 9838–9855.

2. **Stefanescu, D.M.** State of the Art in Solidification Modeling of Cast Iron / D.M. Stefanescu // Science and Processing of Cast Iron VIII, Edited by Li Y.X., Shen Houfa, Xu Q.Y. and Han Z.Q. – 2006. – Tsinghua University Press, Beijing. – P. 32–41.

3. **Ghassemali, E.** Revisiting the graphite nodule in ductile iron / E. Ghassemali, J.C. Hernando, D.M. Stefanescu [et al.] // Scripta Materialia. – 2019. – Vol. 161. – P. 66–69.

*Поступила 07.10.2021*

*Received 07.10.2021*